

## Структурные переходы в металлоорганических каркасах семейства DUT-8

А.С. Крылов<sup>1</sup>, I. Senkovska<sup>2</sup>, С.Н. Крылова<sup>1</sup>, И.Д. Юшина<sup>3</sup>, А.Н. Втюрин<sup>1,4</sup>

<sup>1</sup>Институт физики им. Л.В. Киренского ФИЦ КНЦ СО РАН, 600036 Красноярск, Россия  
e-mail: shusy@iph.krasn.ru

<sup>2</sup>Технический университет Дрездена, 01062 Дрезден, Германия

<sup>3</sup>Южно-Уральский государственный университет, 454080 Челябинск, Россия

<sup>4</sup>Сибирский федеральный университет, 660041 Красноярск, Россия.

Переключаемые металлоорганические каркасы (MOF) или мягкие пористые кристаллы являются уникальными материалами, которые могут преобразовывать свою кристаллическую структуру из плотного непористого в высокопористое открытое состояние и наоборот в ответ на внешние раздражители. Это бистабильные или мультистабильные кристаллические материалы с дальним структурным упорядочением, обратимой трансформируемостью между кристаллическими фазами и постоянной пористостью [1]. Несмотря на высокий потенциал этих новых материалов в качестве перспективных адсорбентов для хранения газа, разделения газов и сенсорных технологий, механизм переключения и факторы, влияющие на переключаемость, еще не до конца понятны.

Некоторые MOF обладают свойством изменять размеры пор под влиянием внешних факторов среды, что приводит к существованию фаз с открытыми или закрытыми порами. Модельные DFT расчеты показали возможность магнитного упорядочения в системе переключаемого DUT-8(Ni) [2]. Выполнены исследования структурных переходов в подобной системе. В докладе представлены результаты исследования методом спектроскопии комбинационного рассеяния света переключаемого металлоорганического каркаса DUT-8 относящегося к классу MOF со столбчатым слоем [3]. Были изучены различные образцы серии DUT-8: с различными атомами в узлах решетки (Ni, Co, Cu) с исходными фазами с открытыми и закрытыми порами, а также в переключаемой и не переключаемой формах. Сравнение спектров комбинационного рассеяния света показало значительную разницу в низкочастотной области для образцов с открытыми ( $23\text{ см}^{-1}$ ) и закрытыми ( $59\text{ см}^{-1}$ ) порами DUT-8 (Ni). [4, 5]. Эти характерные спектральные особенности могут стать основой для экспресс-методики, основанной на спектроскопии КРС, для определения различных переключаемых фаз MOF, а также для *in situ* анализа по спектральному профилю.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Немецкого научно-исследовательского сообщества в рамках научного проекта 21-52-12018.

1. A. Schneemann, V. Bon, I. Schwedler, I. Senkovska, S. Kaskel, R. A. Fischer, *Chem. Soc. Rev.* **43**, 6062 (2014).
2. K. Trepte, S. Schwalbe, G. Seifert, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **17**, 17122 (2015).
3. N. Kavoosi, V. Bon, I. Senkovska, S. Krause, C. Atzori, F. Bonino, J. Pallmann, S. Paasch, E. Brunner, S. Kaskel, *Dalton Trans.* **46**, 4685 (2017).
4. A. Krylov, A. Vtyurin, P. Petkov, I. Senkovska, M. Maliuta, V. Bon, T. Heine, S. Kaskel, E. Slyusareva, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **19**, 32099 (2017).
5. S. Ehrling, I. Senkovska, V. Bon, J.D. Evans, P. Petkov, Y. Krupskaya, V. Kataev, T. Wulf, A. Krylov, A. Vtyurin, et al., *Mater. Chem. A* **7**, 21459 (2019).